

1. 序論

1.1. はじめに

現代の科学技術における知識の獲得、発見には、スーパーコンピュータは必須となっている。同時に、スーパーコンピュータは一般市民の毎日の生活を陰で支えてもいる。わが国は現在、東日本大震災からの復興、福島原発事故の収束や環境浄化、エネルギー問題、少子高齢化、財政逼迫など山積する難題に直面している。スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションは、科学技術を牽引するとともに、我々が直面しているこれらの困難な課題解決にも重要な役割を果たしている。日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開くためにスーパーコンピュータは不可欠の基盤技術である。

国の主導で導入されるスーパーコンピュータにより得られる研究成果や研究手法は、科学技術の最先端をさらに伸ばし、次の時代には、企業自身がスーパーコンピュータを導入することによる産業活性化に展開し得る。また、医療の現場や気象予報などの現業におけるスキルの大幅な向上に繋がる可能性がある。スーパーコンピュータで培った技術が、最終的に産業や社会の現場で利用されること、すなわち計算科学の下方展開の重要性は今後ますます増加、シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割はさらに拡大し、その結果は社会に大きな恩恵をもたらすであろう。

このように社会に貢献する基盤技術としてのスーパーコンピュータが重要性を増す中で、平成 23 年、HPCI 計画の推進にあたり国として今後の HPC 研究開発に必要な事項等を検討するため、文部科学省研究振興局長の諮問会議「HPCI 計画推進委員会」のもとに「今後の HPC 技術の研究開発のあり方を検討する WG」が設置された。そして、同 WG からの提言により「アプリケーション作業部会」と「コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会」が設置され、両者の緊密な連携のもと「計算科学ロードマップ白書」がとりまとめられた¹。同白書は、平成 24 年 3 月に公開されている。更に、作業部会での議論の更なる精査をめざし、文部科学省委託研究「将来の HPCI のあり方の調査研究（アプリケーション分野）」が平成 24 年 7 月にスタートした。そこでは、計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーの課題抽出が行われ、その成果として新たな「計算科学ロードマップ」の取りまとめが行われた。同ロードマップをまとめるにあたっては、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、並びに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約 100 人が一同に会し、演算性能だけではなく、解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーのために必要となる計算機システム全体のバランスを踏まえた適切な性能について深い議論が行われてきた。

本書は、「将来の HPCI のあり方の調査研究（アプリケーション分野）」での議論の成果として抽出された、計算科学からの貢献できる社会的課題の解決・科学的ブレークスルーのため

¹ <http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/>

の課題等を取りまとめたものである。本書をまとめるにあたり、前述のように大学・研究機関、企業で活躍している約 100 人の現役の研究者が中心となり、該当調査研究期間中（平成 24 年 7 月から平成 26 年 3 月まで）に 12 回の討論（ワークショップ）が開催された。なお、「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」が平成 25 年 6 月 25 日に公開した「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）²」では、スーパーコンピュータを先導するエクサスケールの計算機だけでなく、第二階層のスーパーコンピュータ群の必要性も言及されている。本書が示す大規模計算科学の可能性は、将来サイエンスとして何が必要かを純粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のトップマシンだけを意識したものではない。

1.2. 本文書の構成

第 2 章では、5～10 年程度の将来において、「創薬・医療」「総合防災」「エネルギー・環境問題」「社会経済予測」の 4 つの分野における社会的課題に対して、今後の計算科学により実現を目指す具体的な貢献について記載した。

第 3 章では、従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が有機的に結合する事によって実現する新しい科学的課題を挙げた。この中では近未来的に重要性が増すと考えられている、ビッグデータのスーパーコンピュータ利用についても記載した。

第 2 章、第 3 章で想定する読者は、これまで大規模計算を活発に行って来た各計算科学分野の研究者、将来においてデータ解析に大型計算機を必要とする実験科学者だけでなく、製品開発を加速しコストを減らすために大型計算機を利用しようとする産業界の技術者などを含む幅広い層である。そのため、専門性を失わない範囲においてできるだけ平易な表現を用いることを心掛けて記述した。

第 4 章では、2 章と 3 章で記述した社会的および科学的課題の基礎となりうる各分野での研究課題を詳細にまとめた。具体的には、現在から今後 5～15 年程度の中長期にわたる各研究分野における計算科学から期待されるサイエンスブレークスルーおよび社会貢献をまとめた。

また、第 2 章から 4 章にかけて、次世代に解決すべき課題を遂行するために必要なアプリケーション群についても記述し、どの程度の計算機資源が必要かを検討し、各節末尾に要求表としてまとめた。要求表には計算手法や現状のプログラムおよび実機を用いたプロファイルから見積もった実効演算性能（浮動小数点演算性能もしくは整数演算性能）や必要メモリ容量等の値を掲載した。これは一般的には実際の計算機の理論性能とは異なること、また将来に対する推定であることから数倍程度の変動は無視した推定であることに注意されたい。更に、各分野において学会、ワークショップ、シンポジウムなどで行われた意見交換会での議論や提案、コメントについても記述した。なお、本ロードマップ記述された内容は、平成 25 年 3 月 10 日時点のものであり、今後更に精査されていく予定である。最新の計算科学ロードマップについては、Web 版としてインターネット上で随時公開³してゆく。

² http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

³ <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>